

РАДИОЭЛЕКТРОНИКА И ПРИБОРОСТРОЕНИЕ

RADIOELECTRONICS AND INSTRUMENT-MAKING

УДК 537.8:517.958:621.35

Поступила в редакцию 15.10.2015
Received 15.10.2015**В. Т. Ерофеев***НИИ прикладных проблем математики и информатики
Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА ФУЛЛЕРЕН

Разработана интегро-дифференциальная математическая модель фуллерена C_{60} , состоящая из 60 атомов углерода, расположенных на поверхности сферы S радиуса R . Смещения 6 электронов углерода двух сортов ($l = 1, 2$) при воздействии электрического поля \vec{E} описаны с помощью осцилляторной дифференциальной модели

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}_l}{dt^2} + \eta_l \frac{d \vec{r}_l}{dt} + k_l \vec{r}_l = e \vec{E} \exp(-i\omega t), \quad l = 1, 2,$$

где m_e, e – масса и заряд электрона, η_l – коэффициент трения, k_l – коэффициент упругости, \vec{r}_l – смещение электрона сорта l под действием поля.

Дискретно-структурная наночастица (фуллерен) представлена в виде сплошной сферы S с поверхностной плотностью электрических диполей с электрическим моментом

$\vec{p} = (f(\theta_0) \cos \phi_0, f(\theta_0) \sin \phi_0, g(\theta_0))$, θ_0, ϕ_0 – сферические координаты на поверхности S .

Получена система интегральных уравнений для вычисления электрического момента фуллерена:

$$\vec{f}(\theta) + \int_0^\pi (K_{11}(\theta, \theta_0) \vec{f}(\theta_0) + K_{12}(\theta, \theta_0) \vec{g}(\theta_0)) d\theta_0 = \lambda_0(t) \cos \theta,$$

$$\vec{g}(\theta) + \int_0^\pi (K_{21}(\theta, \theta_0) \vec{f}(\theta_0) + K_{22}(\theta, \theta_0) \vec{g}(\theta_0)) d\theta_0 = \lambda_0(t) \sin \theta - \vec{c}_0(t) E_0.$$

Дифференциальные и интегральные уравнения решены аналитически. Вычислен электрический момент фуллерена при воздействии высокочастотной электромагнитной волны. Получена формула эффективной диэлектрической проницаемости низкоразмерного композита из фуллеренов.

Ключевые слова: наночастица, фуллерен, электромагнитное поле, интегро-дифференциальная модель, композит.

V.T. Erofeenko*Research Institute for Applied Problems of Mathematics and Informatics, Belarusian State University, Minsk, Belarus*

SIMULATION OF THE EFFECT OF HIGH FREQUENCY ELECTROMAGNETIC WAVE ON FULLERENE

An integral-differential mathematical model of the fullerene C_{60} , consisted of 60 carbon atoms located on the surface of a sphere S of radius R , is developed. Shifts of 6 carbon electrons of two grades ($l = 1, 2$) when exposed to an electric field \vec{E} are described with the help of the oscillatory differential model

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}_l}{dt^2} + \eta_l \frac{d \vec{r}_l}{dt} + k_l \vec{r}_l = e \vec{E} \exp(-i\omega t), \quad l = 1, 2,$$

where are m_e, e – mass and charge of the electron, η_l – friction coefficient, k_l – elasticity coefficient, \vec{r}_l – shift of the electron of grade l when exposed to an electric field.

The lattice-discrete nanoparticle (fullerene) is represented as a continuous sphere S with the surface density of the electrical dipoles with the electric moment

$\vec{p} = (f(\theta_0)\cos\phi_0, f(\theta_0)\sin\phi_0, g(\theta_0))$, θ_0, ϕ_0 – spherical coordinates on the surface S .

A system of integral equations for calculating the electric moment of the fullerene is obtained:

$$\begin{aligned} \bar{f}(\theta) + \int_0^\pi (K_{11}(\theta, \theta_0)\bar{f}(\theta_0) + K_{12}(\theta, \theta_0)\bar{g}(\theta_0))d\theta_0 &= \lambda_0(t)\cos\theta, \\ \bar{g}(\theta) + \int_0^\pi (K_{21}(\theta, \theta_0)\bar{f}(\theta_0) + K_{22}(\theta, \theta_0)\bar{g}(\theta_0))d\theta_0 &= \lambda_0(t)\sin\theta - \bar{c}_0(t)E_0. \end{aligned}$$

The differential and integral equations are solved analytically. The electric moment of the fullerene under the action of high-frequency electromagnetic wave is calculated. A formula of the effective permittivity of the low-dimensional composite from fullerene is obtained.

Keywords: nanoparticle, fullerene, electromagnetic fields, integral-differential model, composite.

Введение. В последние десятилетия увеличилось число научных исследований и разработок природных и искусственных нанообъектов и материалов из них [1–6]. К нанообъектам относятся пространственные объекты, которые характеризуются наноразмерами хотя бы в одном из трех измерений, то есть являются низкоразмерными системами [5]. Актуальным является исследование композитных материалов, формируемых из нанообъектов различных типов. Особенность нанокompозитов заключается в том, что в них проявляются уникальные свойства, основанные на квантовых эффектах. Устойчивость нанообъектов базируется на электрических и магнитных силах, поэтому большое значение приобретают исследования электродинамики взаимодействия электромагнитных полей с наноматериалами и электродинамических свойств материалов. В [4] приводится значительный перечень литературных источников, отражающих основные направления исследований наноструктур. Уникальные свойства наноструктур и материалов из них определяют их практическое использование для создания устройств обработки информации в электронике, экранирующих пленочных структур, высокочувствительных сенсорных элементов, излучателей средств связи и другое [2, 7].

В настоящей статье разработана электродинамическая дипольная модель наночастицы (фуллере́на) при воздействии высокочастотного электромагнитного поля. Математическая модель наночастицы составлена из обыкновенных дифференциальных уравнений и системы интегральных уравнений второго рода, аналитическое решение которых позволяет определить электрический момент частицы. Проведен анализ композита из случайно распределенных в пространстве фуллеренов, определена его диэлектрическая проницаемость.

Дипольная модель фуллере́на. В пространстве R^3 рассмотрим наночастицу, представляющую собой большое число атомов углерода, расположенных на поверхности сферы радиуса R (рис. 1). Атомы углерода, состоящие из положительных и отрицательных электрических зарядов, при воздействии внешнего электромагнитного поля \vec{E}_0, \vec{H}_0 будем моделировать электрическими диполями с заданными электрическими моментами. Для перехода от дискретной структуры фуллере́на к идеальной модели моменты диполей распределим равномерно по поверхности сферы с некоторой поверхностной плотностью. Таким образом, в результате моделирования фуллерен заменяется непрерывно распределенными по поверхности сферы электрическими диполями. Электромагнитное поле диполей определяет поле фуллере́на. Для математической реализации модели в пространстве R^3 с электрической и магнитной постоянными ϵ_0, μ_0 на сфере S радиуса R распределим электрические диполи с поверхностным электрическим моментом $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ (рис. 2). Сфера S делит пространство R^3 на две области: $D_1 (0 < r < R)$, $D_2 (r > R)$. Зафиксируем декартову систему координат $Oxyz$, где O – центр сферы. Рассмотрим случай, когда диполи распределены с осевой симметрией вокруг оси Oz . Момент $\vec{p}(O_1)$, $O_1 \in S$, ориентирован в азимутальном направлении точки O_1 . Пусть $O_1x_1y_1z_1$ – система координат, параллельно сдвинутая относительно $Oxyz$. С декартовыми координатами

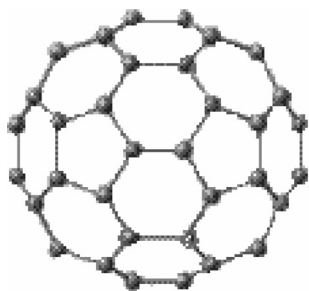


Рис. 1. Структура фуллере́на C_{60}

Fig. 1. Structure of fullerene C_{60}

фуллерен заменяется непрерывно распределенными по поверхности сферы электрическими диполями. Электромагнитное поле диполей определяет поле фуллере́на. Для математической реализации модели в пространстве R^3 с электрической и магнитной постоянными ϵ_0, μ_0 на сфере S радиуса R распределим электрические диполи с поверхностным электрическим моментом $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ (рис. 2). Сфера S делит пространство R^3 на две области: $D_1 (0 < r < R)$, $D_2 (r > R)$. Зафиксируем декартову систему координат $Oxyz$, где O – центр сферы. Рассмотрим случай, когда диполи распределены с осевой симметрией вокруг оси Oz . Момент $\vec{p}(O_1)$, $O_1 \in S$, ориентирован в азимутальном направлении точки O_1 . Пусть $O_1x_1y_1z_1$ – система координат, параллельно сдвинутая относительно $Oxyz$. С декартовыми координатами

связем соответствующие сферические координаты. $Or\theta\phi$, $O_1r_1\theta_1\phi_1$, θ_0, ϕ_0 – сферические координаты точки O_1 в системе $Or\theta\phi$; $p_x = f(\theta_0)\cos\phi_0$, $p_y = f(\theta_0)\sin\phi_0$, $p_z = g(\theta_0)$.

Представим электромагнитное поле диполей, расположенных в окрестности dS точки O_1 , $dS \in S$, через сферические базисные электромагнитные поля [8, с. 174]:

$$\begin{aligned}\vec{E}_d(\vec{r}_1, k_0) &= e_0(a_0\tilde{n}_{01}(\vec{r}_1, k_0) + a_{+1}\tilde{n}_{11}(\vec{r}_1, k_0) + \\ &+ a_{-1}\tilde{n}_{-11}(\vec{r}_1, k_0))dS, \\ \vec{H}_d(\vec{r}_1, k_0) &= h_0e_0(a_0\tilde{m}_{01}(\vec{r}_1, k_0) + a_{+1}\tilde{m}_{11}(\vec{r}_1, k_0) + \\ &+ a_{-1}\tilde{m}_{-11}(\vec{r}_1, k_0))dS,\end{aligned}$$

где

$$h_0 = \frac{k_0}{i\omega\mu_0} = \frac{1}{iZ_0}, \quad Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}, \quad k_0 = \frac{\omega}{c}, \quad e_0 = \frac{ik_0^3}{4\pi\epsilon_0};$$

$$a_0 = p_z = g(\theta_0), \quad a_{+1} = -\frac{1}{2}(p_x - ip_y) = -\frac{1}{2}f(\theta_0)e^{-i\phi_0},$$

$$a_{-1} = p_x + ip_y = f(\theta_0)e^{i\phi_0}, \quad a_m = \bar{a}_m e^{-im\phi_0}, \quad m = 0, \pm 1,$$

$$\bar{a}_{+1} = -\frac{1}{2}f(\theta_0), \quad \bar{a}_{-1} = f(\theta_0), \quad \bar{a}_0 = g(\theta_0), \quad dS = R^2 \sin\theta_0 d\theta_0 d\phi_0 = R^2 dS_0,$$

$0 \leq \theta_0 \leq \pi$, $0 \leq \phi_0 \leq 2\pi$; $\omega = 2\pi f$ – круговая частота колебаний диполя; координатные функции $f(\theta_0)$, $g(\theta_0)$ задают распределение момента \vec{p} диполей на поверхности сферы.

На сферическую структуру воздействует электромагнитное поле \vec{E}_0, \vec{H}_0 , которое колеблется с частотой ω . В центре сферы поля принимают значения

$$\vec{E}_0(0) = (0, 0, E_0), \quad \vec{H}_0(0) = (H_{0x}, H_{0y}, 0). \quad (2)$$

Поле \vec{E}_0, \vec{H}_0 слабо изменяется в окрестности сферы, так как предполагается, что длина волны значительно больше диаметра сферы S . В связи с этим будем считать, что поле имеет значение (2) во всех точках сферы и воздействует на диполи.

В дальнейшем поле (1) выразим через регулярные сферические функции в сферической системе координат $Or\theta\phi$ в области D_1 , используя соответствующие теоремы сложения [8, с. 150]. Выберем разложение поля в форме, разработанной в [9]:

$$\vec{E}_d(\vec{r}_1, k_0) = e_0 \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{p=-s}^s \left(A_{ps}^{(+)} \vec{e}_+ + A_{ps}^{(-)} \vec{e}_- + A_{ps}^{(0)} \vec{e}_z \right) U_s^p(\vec{r}, k_0) dS, \quad (3)$$

$$\vec{H}_d(\vec{r}_1, k_0) = h_0 e_0 \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{p=-s}^s \left(B_{ps}^{(+)} \vec{e}_+ + B_{ps}^{(-)} \vec{e}_- + B_{ps}^{(0)} \vec{e}_z \right) U_s^p(\vec{r}, k_0) dS, \quad 0 \leq r < R,$$

где $\vec{e}_+ = i\vec{e}_y + \vec{e}_x$, $\vec{e}_- = i\vec{e}_y - \vec{e}_x$; $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ – орты декартовой системы координат,

$$A_{ps}^{(+)} = \sum_{m=-1}^1 \bar{a}_m A_{ps}^{m1}, \quad A_{ps}^{(-)} = \sum_{m=-1}^1 \bar{a}_m A_{ps}^{m1}, \quad A_{ps}^{(0)} = \sum_{m=-1}^1 \bar{a}_m A_{ps}^{m1},$$

$$B_{ps}^{(+)} = \sum_{m=-1}^1 \bar{a}_m B_{ps}^{m1}, \quad B_{ps}^{(-)} = \sum_{m=-1}^1 \bar{a}_m B_{ps}^{m1}, \quad B_{ps}^{(0)} = \sum_{m=-1}^1 \bar{a}_m B_{ps}^{m1},$$

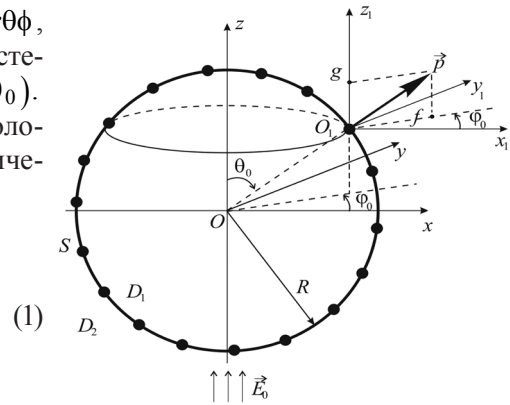


Рис. 2. Дипольная модель фуллерена в виде сплошной сферы

Fig. 2. Dipole model of fullerene in form of continuous sphere

$$A_{ps}^{m1+} = \frac{1}{6} \left[(2-m)(3-m) \bar{C}_{ps}^{m-1,2} - 2(1+m)m \bar{C}_{ps}^{m-1,0} \right] e^{-i(p+1)\phi_0},$$

$$A_{ps}^{m1-} = \frac{1}{6} \left[\bar{C}_{ps}^{m+1,2} - 2\bar{C}_{ps}^{m+1,0} \right] e^{-i(p-1)\phi_0}, \quad (4)$$

$$A_{ps}^{m10} = \frac{1}{3} \left[(2-m) \bar{C}_{ps}^{m,2} + 2(1+m) \bar{C}_{ps}^{m,0} \right] e^{-ip\phi_0},$$

$$B_{ps}^{m1+} = -\frac{i}{2} (1+m)(2-m) \bar{C}_{ps}^{m-1,1} e^{-i(p+1)\phi_0},$$

$$B_{ps}^{m1-} = \frac{i}{2} \bar{C}_{ps}^{m+1,1} e^{-i(p-1)\phi_0}, \quad B_{ps}^{m10} = -im \bar{C}_{ps}^{m,1} e^{-ip\phi_0},$$

$$\bar{C}_{ps}^{mn} = \frac{(2s+1)(s-p)!}{(s+p)!} \sum_{\delta=|s-n|}^{|s+n|} i^{\delta+s-n} b_{\delta}^{(nm sp)} (-1)^{\delta} h_{\delta}^{(1)}(k_0 R) P_{\delta}^{m-p}(\cos \theta_0), \quad (5)$$

$$U_s^P(\vec{r}, k_0) = j_s(k_0 r) P_s^P(\cos \theta) e^{ip\phi},$$

$j_s(x)$, $h_s^{(1)}(x)$ – сферические функции Бесселя, $P_s^P(x)$ – присоединенная функция Лежандра [10], $b_{\delta}^{(nm sp)}$ определены в [11, с. 232].

Электромагнитное поле внутри сферической наночастицы. Совокупность электрических диполей на поверхности сферы малых размеров будем рассматривать как наночастицу, моделирующую фуллерен. Для вычисления электромагнитного поля частицы просуммируем поля всех диполей на сфере. Для определения поля внутри частицы достаточно вычислить интеграл поля (3) по сфере S :

$$\vec{E}_R = \int_S \vec{E}_d = \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{p=-s}^s \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left(A_{ps}^{(+)} \vec{e}_+ + A_{ps}^{(-)} \vec{e}_- + A_{ps}^{(0)} \vec{e}_z \right) dS_0 U_s^P(\vec{r}, k_0), \quad 0 \leq r < R,$$

$$\vec{H}_R = \int_S \vec{H}_d = h_0 \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{p=-s}^s \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left(B_{ps}^{(+)} \vec{e}_+ + B_{ps}^{(-)} \vec{e}_- + B_{ps}^{(0)} \vec{e}_z \right) dS_0 U_s^P(\vec{r}, k_0),$$

$$\alpha = \frac{iR^2 k_0^3}{2\epsilon_0}, \quad dS_0 = \sin \theta_0 d\theta_0 d\phi_0.$$

Учитывая структуру коэффициентов (4), рассчитаем интегралы по переменной ϕ_0 , тогда для электрического поля \vec{E}_R получим представление внутри сферы S в области D_1 :

$$\vec{E}_R = \alpha \left(\sum_{s=1}^{\infty} \left(A_s^{(+)} U_s^{-1} \vec{e}_+ + A_s^{(-)} U_s^1 \vec{e}_- \right) + \sum_{s=0}^{\infty} A_s^{(0)} U_s^0 \vec{e}_z \right), \quad 0 \leq r < R, \quad (6)$$

где

$$A_s^{(+)} = \int_0^{\pi} \left(g \bar{C}_{1s}^{-1,2} + f \left(2\bar{C}_{1s}^{-2,2} - \frac{1}{6} \bar{C}_{1s}^{0,2} + \frac{1}{3} \bar{C}_{1s}^{0,0} \right) \right) \sin \theta_0 d\theta_0,$$

$$A_s^{(-)} = \int_0^{\pi} \frac{1}{6} \left(g \bar{C}_{1s}^{1,2} + f \left(\bar{C}_{1s}^{0,2} - 2\bar{C}_{1s}^{0,0} - \frac{1}{2} \bar{C}_{1s}^{2,2} \right) \right) \sin \theta_0 d\theta_0,$$

$$A_s^{(0)} = \int_0^{\pi} \left(\frac{2}{3} g \left(\bar{C}_{0s}^{0,2} + \bar{C}_{0s}^{0,0} \right) + f \left(\bar{C}_{0,0}^{1,2} - \frac{1}{6} \bar{C}_{0s}^{1,2} \right) \right) \sin \theta_0 d\theta_0.$$

Упростим модель, используя малость размеров частицы по отношению к длине волны. Имеем асимптотическую формулу $j_n(k_0R) \underset{k_0R \rightarrow 0}{\approx} \frac{2^n n!}{(2n+1)!} (k_0R)^n$ [10]. В дальнейшем в представлении (6) будем пренебрегать величинами второго порядка малости $(k_0R)^2 \approx 0$ ($j_n(k_0R) \approx 0$, $n \geq 2$). Тогда получим асимптотическую формулу поля внутри частицы:

$$\vec{E}_R = \alpha \left(A_1^{(+)} U_1^{-1} \vec{e}_+ + A_1^{(-)} U_1^1 \vec{e}_- + \left(A_0^{(0)} U_0^0 + A_1^{(0)} U_1^0 \right) \vec{e}_z \right) \quad \text{в } D_1, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} A_1^{(+),(-)} &= \int_0^\pi \left(g L^{(+),(-)}(\theta_0) + f K^{(+),(-)}(\theta_0) \right) \sin \theta_0 d\theta_0, \\ A_{0,1}^{(0)} &= \int_0^\pi \left(g L_{0,1}^{(0)}(\theta_0) + f K_{0,1}^{(0)}(\theta_0) \right) \sin \theta_0 d\theta_0; \\ L^{(+)} &= \bar{C}_{-11}^{-1,2}, \quad K^{(+)} = 2\bar{C}_{-11}^{-2,2} - \frac{1}{6}\bar{C}_{-11}^{0,2} + \frac{1}{3}\bar{C}_{-11}^{0,0}, \\ L^{(-)} &= \frac{1}{6}\bar{C}_{11}^{1,2}, \quad K^{(-)} = \frac{1}{6} \left(\bar{C}_{11}^{0,2} - 2\bar{C}_{11}^{0,0} - \frac{1}{2}\bar{C}_{11}^{2,2} \right), \\ L_0^{(0)} &= \frac{2}{3} \left(\bar{C}_{00}^{0,2} + \bar{C}_{00}^{0,0} \right), \quad K_0^{(0)} = \bar{C}_{00}^{-1,2} - \frac{1}{6}\bar{C}_{00}^{1,2}, \\ L_1^{(0)} &= \frac{2}{3} \left(\bar{C}_{01}^{0,2} + \bar{C}_{01}^{0,0} \right), \quad K_1^{(0)} = \bar{C}_{01}^{-1,2} - \frac{1}{6}\bar{C}_{01}^{1,2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Правые части равенств (8) вычисляются с помощью формулы (5) и формул, приведенных в [11, с. 232]:

$$\begin{aligned} \bar{C}_{-11}^{-1,2} &= -\frac{3}{5} \left(h_1^{(1)}(k_0R) P_1(\cos \theta_0) + h_3^{(1)}(k_0R) P_3(\cos \theta_0) \right), \\ \bar{C}_{-11}^{-2,2} &= -\frac{3}{5} \left(h_1^{(1)}(k_0R) P_1^{-1}(\cos \theta_0) + h_3^{(1)}(k_0R) P_3^{-1}(\cos \theta_0) \right), \\ \bar{C}_{-11}^{0,2} &= -\frac{3}{5} \left(h_1^{(1)}(k_0R) P_1^1(\cos \theta_0) + h_3^{(1)}(k_0R) P_3^1(\cos \theta_0) \right), \\ \bar{C}_{-11}^{0,0} &= -3h_1^{(1)}(k_0R) P_1^1(\cos \theta_0), \\ \bar{C}_{11}^{1,2} &= -\frac{9}{5} \left(h_1^{(1)}(k_0R) P_1(\cos \theta_0) + h_3^{(1)}(k_0R) P_3(\cos \theta_0) \right), \\ \bar{C}_{11}^{0,2} &= -\frac{3}{5} \left(h_1^{(1)}(k_0R) P_1^{-1}(\cos \theta_0) + 6h_3^{(1)}(k_0R) P_3^{-1}(\cos \theta_0) \right), \\ \bar{C}_{11}^{0,0} &= -3h_1^{(1)}(k_0R) P_1^{-1}(\cos \theta_0), \\ \bar{C}_{11}^{2,2} &= -\frac{3}{5} \left(6h_1^{(1)}(k_0R) P_1^1(\cos \theta_0) + h_3^{(1)}(k_0R) P_3^1(\cos \theta_0) \right), \\ \bar{C}_{00}^{0,2} &= h_2^{(1)}(k_0R) P_2(\cos \theta_0), \quad \bar{C}_{00}^{0,0} = h_0^{(1)}(k_0R), \end{aligned}$$

$$\bar{C}_{00}^{-1,2} = h_2^{(1)}(k_0 R) P_2^{-1}(\cos \theta_0), \quad \bar{C}_{00}^{1,2} = h_2^{(1)}(k_0 R) P_2^1(\cos \theta_0),$$

$$\bar{C}_{01}^{0,2} = -\frac{3}{5} \left(2h_1^{(1)}(k_0 R) P_1(\cos \theta_0) - 3h_3^{(1)}(k_0 R) P_3(\cos \theta_0) \right),$$

$$\bar{C}_{01}^{0,0} = 3h_1^{(1)}(k_0 R) P_1(\cos \theta_0),$$

$$\bar{C}_{01}^{-1,2} = -\frac{3}{5} \left(h_1^{(1)}(k_0 R) P_1^{-1}(\cos \theta_0) - 4h_3^{(1)}(k_0 R) P_3^{-1}(\cos \theta_0) \right),$$

$$\bar{C}_{01}^{1,2} = -\frac{3}{5} \left(3h_1^{(1)}(k_0 R) P_1^1(\cos \theta_0) - 2h_3^{(1)}(k_0 R) P_3^1(\cos \theta_0) \right).$$

Определим поле (7) на меридиане сферы S в точке $M_0(r = R, \theta, \phi = 0)$:

$$\begin{aligned} \vec{E}_R \Big|_{\substack{r=R \\ \phi=0}} = \alpha \Bigg[& \left(\left(\frac{1}{2} A_1^{(+)} + A_1^{(-)} \right) \vec{e}_x + i \left(\frac{1}{2} A_1^{(+)} - A_1^{(-)} \right) \vec{e}_y \right) j_1(k_0 R) \sin \theta + \\ & + \left(A_0^0 j_0(k_0 R) + A_1^{(0)} j_1(k_0 R) \cos \theta \right) \vec{e}_z \Bigg]. \end{aligned}$$

Учитывая (8), получим формулы:

$$L^{(+)} = -\frac{3}{2} \left(\frac{2}{k_0 R} h_2^{(1)}(k_0 R) - h_3^{(1)}(k_0 R) \sin^2 \theta_0 \right) \cos \theta_0,$$

$$K^{(+)} = \frac{3}{2} \left(\frac{1}{k_0 R} h_2^{(1)}(k_0 R) - h_3^{(1)}(k_0 R) \cos^2 \theta_0 \right) \sin \theta_0,$$

$$L^{(-)} = -\frac{3}{4} \left(\frac{2}{k_0 R} h_2^{(1)}(k_0 R) - h_3^{(1)}(k_0 R) \sin^2 \theta_0 \right) \cos \theta_0,$$

$$K^{(-)} = \frac{3}{4} \left(\frac{1}{k_0 R} h_2^{(1)}(k_0 R) - h_3^{(1)}(k_0 R) \cos^2 \theta_0 \right) \sin \theta_0,$$

$$L_0^{(0)} = \frac{2}{k_0 R} h_1^{(1)}(k_0 R) - h_2^{(1)}(k_0 R) \sin^2 \theta_0,$$

$$K_0^{(0)} = h_2^{(1)}(k_0 R) \sin \theta_0 \cos \theta_0,$$

$$L_1^{(0)} = 3 \left(\frac{2}{k_0 R} h_2^{(1)}(k_0 R) - h_3^{(1)}(k_0 R) \sin^2 \theta_0 \right) \cos \theta_0,$$

$$K_1^{(0)} = -3 \left(\frac{1}{k_0 R} h_2^{(1)}(k_0 R) - h_3^{(1)}(k_0 R) \cos^2 \theta_0 \right) \sin \theta_0.$$

Легко показать, что $\frac{1}{2} A_1^{(+)} - A_1^{(-)} = 0$, так как $L^{(-)} = \frac{1}{2} L^{(+)}$, $K^{(-)} = \frac{1}{2} K^{(+)}$. В результате определим значение электрического поля (7), созданного всеми диполями частицы, на поверхности частиц S в точке $M_0(r = R, \theta, \phi = 0)$:

$$\vec{E}_R \Big|_{\substack{r=R \\ \phi=0}} = F(\theta) \vec{e}_x + G(\theta) \vec{e}_z, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned}
 F(\theta) &= \alpha A_1^{(+)} j_1(\xi_0) \sin \theta = \alpha j_1(\xi_0) \sin \theta \int_0^\pi \left(g(\theta_0) L^{(+)}(\theta_0) + f(\theta_0) K^{(+)}(\theta_0) \right) \sin \theta_0 d\theta_0, \\
 G(\theta) &= \alpha \left(A_0^{(0)} j_0(\xi_0) + A_1^{(0)} j_1(\xi_0) \cos \theta \right) = \\
 &= \alpha \int_0^\pi \left[g(\theta_0) \left(j_0(\xi_0) L_0^{(0)}(\theta_0) + j_1(\xi_0) \cos \theta L_1^{(0)}(\theta_0) \right) + \right. \\
 &\quad \left. + f(\theta_0) \left(j_0(\xi_0) K_0^{(0)}(\theta_0) + j_1(\xi_0) \cos \theta K_1^{(0)}(\theta_0) \right) \right] \sin \theta_0 d\theta_0.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Дифференциальная модель диполя при воздействии электромагнитного поля. Диполь, расположенный в точке $M_0(r=R, \theta, \phi=0)$ на поверхности сферы S , подвергается воздействию электрического поля $\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_R$, которое состоит из первичного поля (2) и поля, создаваемого другими диполями фуллера. Фуллерен C_{60} состоит из 60 атомов углерода, расположенных на поверхности S радиуса $R = 0,3512$ нм [3, с. 145]. Положительно заряженное ядро углерода имеет большую массу, поэтому при воздействии электромагнитного поля совершает незначительные перемещения, которыми будем пренебрегать. Смещения 6 электронов двух сортов в углероде при воздействии электрического поля будем учитывать. Обозначим: $v_l = N_l / \pi R^2$ – поверхностная концентрация электронов сорта l ($l=1, 2$) на поверхности S , где N_l – число электронов сорта l на поверхности фуллера C_{60} ($N_1 = 120, N_2 = 240$). Смещения электронов под действием поля опишем с помощью осцилляторной модели [12, с. 128], представляющей собой дифференциальные уравнения:

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}_l}{dt^2} + \eta_l \frac{d\vec{r}_l}{dt} + k_l \vec{r}_l = e \vec{E} \exp(-i\omega t), \quad l=1, 2, \tag{11}$$

где m_e, e – масса и заряд электрона, η_l – коэффициент трения, k_l – коэффициент упругости, \vec{r}_l – смещение электрона сорта l под действием поля.

Разрешая уравнения (11), получим решение

$$\vec{r}_l = \vec{r}_l^0 - c_l \vec{E} \exp(-i\omega t), \quad l=1, 2, \tag{12}$$

где $\vec{r}_l^0 = \vec{\alpha}_l e^{\lambda_l^{(1)} t} + \vec{\beta}_l e^{\lambda_l^{(2)} t}$ – общее решение однородного уравнения (11); $\vec{\alpha}_l, \vec{\beta}_l$ – произвольные векторы,

$$\lambda_l^{(1),(2)} = -\frac{\gamma_l}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma_l^2}{4} - \omega_l^2}, \quad c_l = \frac{e}{m_e (\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l)},$$

$\omega_l = \sqrt{\frac{k_l}{m_e}}$ – частота собственных колебаний, $\gamma_l = \frac{\eta_l}{m_e}$ – декремент затухания. Векторы $\vec{\alpha}_l, \vec{\beta}_l$ определим из начальных условий:

$$\vec{r}_l^0 \Big|_{t=0} = \vec{R}_l, \quad \frac{d\vec{r}_l^0}{dt} \Big|_{t=0} = 0, \tag{13}$$

где $\vec{R}_l = R_l \vec{r}_0$ – начальное отклонение электрона l -го типа, $\vec{r}_0 = \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta \vec{e}_z$.

Из условий (13) следует, что

$$\vec{\alpha}_l = \alpha_l \vec{r}_0, \quad \vec{\beta}_l = \beta_l \vec{r}_0, \tag{14}$$

$$\alpha_l = \frac{\lambda_l^{(2)} R_l}{\lambda_l^{(2)} - \lambda_l^{(1)}}, \quad \beta_l = -\frac{\lambda_l^{(1)} R_l}{\lambda_l^{(2)} - \lambda_l^{(1)}}.$$

Система интегральных уравнений. Для вычисления электрического момента фуллерена построим интегральные уравнения. Учитывая (12), определим поверхностный электрический момент диполей сорта l на поверхности S в точке M_0 на основании формулы $\vec{p}_l = e v_l \vec{r}_l$. С учетом (2), (9), (14) определим суммарный электрический поверхностный момент в точке M_0 :

$$\begin{aligned} \vec{p}(\theta) &= \vec{f}(\theta) \vec{e}_x + \vec{g}(\theta) \vec{e}_z = \sum_{l=1}^2 \vec{p}_l = \sum_{l=1}^2 e v_l \left(\vec{r}_l^0 - c_l e^{-i\omega t} \vec{E} \Big|_{\substack{r=R \\ \phi=0}} \right) = \\ &= \sum_{l=1}^2 e v_l \left[\left(\alpha_l e^{\lambda_l^{(1)} t} + \beta_l e^{\lambda_l^{(2)} t} \right) \vec{r}_0 + c_l e^{-i\omega t} \vec{E} \Big|_{\substack{r=R \\ \phi=0}} \right] = \\ &= \lambda_0(t) \vec{r}_0 - c_0 \left(\vec{E}_R \Big|_{\substack{r=R \\ \phi=0}} + \vec{E}_0 \right) = \lambda_0(t) (\cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta \vec{e}_z) - \\ &\quad - \bar{c}_0(t) (F(\theta) \vec{e}_x + (G(\theta) + E_0) \vec{e}_z), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_0(t) &= e \sum_{l=1}^2 v_l \left(\alpha_l e^{\lambda_l^{(1)} t} + \beta_l e^{\lambda_l^{(2)} t} \right), \quad c_0 = e(v_1 c_1 + v_2 c_2), \\ (\vec{E}_R, \vec{E}_0, \bar{c}_0, \vec{f}, \vec{g}) &= (\vec{E}_R, \vec{E}_0, c_0, f, g) e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (16)$$

Сравнение правой и левой частей равенства (15) приводит к соотношениям

$$f(\theta) = \lambda_0(t) \cos \theta - \bar{c}_0(t) F(\theta), \quad g(\theta) = \lambda_0(t) \sin \theta - \bar{c}_0(t) (G(\theta) + E_0).$$

Подставляя сюда интегралы (10), получим систему интегральных уравнений

$$\begin{aligned} \vec{f}(\theta) + \int_0^\pi (K_{11}(\theta, \theta_0) \vec{f}(\theta_0) + K_{12}(\theta, \theta_0) \vec{g}(\theta_0)) d\theta_0 &= \lambda_0(t) \cos \theta, \\ \vec{g}(\theta) + \int_0^\pi (K_{21}(\theta, \theta_0) \vec{f}(\theta_0) + K_{22}(\theta, \theta_0) \vec{g}(\theta_0)) d\theta_0 &= \lambda_0(t) \sin \theta - \bar{c}_0(t) E_0, \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} K_{11}(\theta, \theta_0) &= \bar{j}_1(\xi_0) K^{(+)}(\theta_0) \sin \theta_0 \sin \theta, \quad K_{12}(\theta, \theta_0) = \bar{j}_1(\xi_0) L^{(+)}(\theta_0) \sin \theta_0 \sin \theta, \\ K_{21}(\theta, \theta_0) &= \left(\bar{j}_1(\xi_0) K_0^{(0)}(\theta_0) + \bar{j}_1(\xi_0) K_1^{(0)}(\theta_0) \cos \theta \right) \sin \theta_0, \\ K_{22}(\theta, \theta_0) &= \left(\bar{j}_0(\xi_0) L_0^{(0)}(\theta_0) + \bar{j}_1(\xi_0) L_1^{(0)}(\theta_0) \cos \theta \right) \sin \theta_0, \\ \bar{j}_0(\xi_0) &= c_0 \alpha j_0(\xi_0), \quad \bar{j}_1(\xi_0) = c_0 \alpha j_1(\xi_0). \end{aligned} \quad (18)$$

Структура подынтегральных функций (18) показывает, что решение уравнений (17) имеет вид

$$f(\theta) = b_1 \cos \theta + b_2 \sin \theta, \quad g(\theta) = b_3 + b_4 \cos \theta + b_5 \sin \theta. \quad (19)$$

Подставляя (19) в (17) и приравнявая коэффициенты при функциях $\cos \theta, \sin \theta$, получим систему алгебраических уравнений для определения коэффициентов b_m :

$$b_m + \sum_{n=1}^5 c_{mn} b_n = F_m, \quad m = 1, 2, 3, 4, 5, \quad (20)$$

где

$$F_1 = \lambda_0, \quad F_2 = 0, \quad F_3 = -\bar{c}_0 E_0, \quad F_4 = 0, \quad F_5 = \lambda_0.$$

Диэлектрическая проницаемость композита из фуллеренов. Вычислим матричные коэффициенты c_{mn} системы (20). Из структуры уравнений (17) и функций (18) следует $c_{1n} = 0$, $c_{5n} = 0$, $n = \overline{1, 5}$, тогда, разрешая первое и пятое уравнения (20), получаем $b_1 = b_5 = \lambda_0$. Для матричных коэффициентов при вычислении интегралов получим формулы:

$$\begin{aligned} c_{21} &= \bar{j}_1 \int_0^\pi K^{(+)} \sin \theta_0 \cos \theta_0 d\theta_0 = 0, \quad c_{23} = \bar{j}_1 \int_0^\pi L^{(+)} \sin \theta_0 d\theta_0 = 0, \\ c_{25} &= \bar{j}_1 \int_0^\pi L^{(+)} \sin^2 \theta_0 d\theta_0 = 0, \quad c_{24} = -c_{22}, \\ c_{22} &= \bar{j}_1 \int_0^\pi K^{(+)} \sin^2 \theta_0 d\theta_0 = \frac{2}{5} \bar{j}_1 \left(\frac{5}{\xi_0} h_2^{(1)}(\xi_0) - h_3^{(1)}(\xi_0) \right) = \frac{2}{5} \bar{j}_1 h_1^{(1)}(\xi_0), \\ c_{32} &= \bar{j}_0 \int_0^\pi K_0^{(0)} \sin^2 \theta_0 d\theta_0 = 0, \quad c_{34} = \bar{j}_0 \int_0^\pi L_0^{(0)} \sin \theta_0 \cos \theta_0 d\theta_0 = 0, \\ c_{31} &= \bar{j}_0 \int_0^\pi K_0^{(0)} \sin \theta_0 \cos \theta_0 d\theta_0 = \frac{\pi}{8} \bar{j}_0 h_2^{(1)}(\xi_0), \\ c_{33} &= \bar{j}_0 \int_0^\pi L_0^{(0)} \sin \theta_0 d\theta_0 = \frac{4}{3} \bar{j}_0 \left(\frac{3}{\xi_0} h_1^{(1)}(\xi_0) - h_2^{(1)}(\xi_0) \right) = \frac{4}{3} \bar{j}_0 h_0^{(1)}(\xi_0), \\ c_{35} &= \bar{j}_0 \int_0^\pi L_0^{(0)} \sin^2 \theta_0 d\theta_0 = \pi \left(\frac{1}{\xi_0} h_1^{(1)}(\xi_0) - \frac{3}{8} h_2^{(1)}(\xi_0) \right), \\ c_{41} &= \bar{j}_1 \int_0^\pi K_1^{(0)} \sin \theta_0 \cos \theta_0 d\theta_0 = 0, \quad c_{43} = \bar{j}_1 \int_0^\pi L_1^{(0)} \sin \theta_0 d\theta_0 = 0, \\ c_{45} &= \bar{j}_1 \int_0^\pi L_1^{(0)} \sin^2 \theta_0 d\theta_0 = 0, \\ c_{44} &= \bar{j}_1 \int_0^\pi L_1^{(0)} \sin^2 \theta_0 \cos \theta_0 d\theta_0 = \frac{4}{5} \bar{j}_1 \left(\frac{5}{\xi_0} h_2^{(1)}(\xi_0) - h_3^{(1)}(\xi_0) \right) = \frac{4}{5} \bar{j}_1 h_1^{(1)}(\xi_0), \\ c_{42} &= -c_{44} = -2c_{22}. \end{aligned} \tag{21}$$

Формулы (21) значительно упрощают систему уравнений (20). Из третьего уравнения (20) при $m = 3$ следует

$$b_3 = -\frac{\bar{c}_0 E_0 + (c_{31} + c_{35}) \lambda_0}{1 + c_{33}}. \tag{22}$$

Второе и четвертое уравнения (20) с номерами $m = 2$ и $m = 4$ образуют систему для определения величин b_2, b_4 :

$$(1 + c_{22}) b_2 - c_{22} b_4 = 0, \quad c_{44} b_2 - (1 + c_{44}) b_4 = 0.$$

Следует $b_2 = b_4 = 0$, так как определитель системы уравнений не равен нулю.

Используя решения системы (20), вычислим функции (19) и поверхностный момент:

$$\vec{p}(\theta) = f(\theta)\vec{e}_x + g(\theta)\vec{e}_z = \lambda_0 \cos \theta \vec{e}_x + (b_3 + \lambda_0 \sin \theta)\vec{e}_z.$$

Для определения суммарного момента всех диполей, сосредоточенных на поверхности S , вычислим интеграл по поверхности S (электрический момент фуллерена):

$$\vec{P}_\Phi = \int_S \vec{p} dS = R^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{p}(\theta) \sin \theta d\theta d\phi = \pi R^2 (4b_3 + \pi \lambda_0) \vec{e}_z.$$

Заметим, что функция $\lambda_0(t)$ (16) экспоненциально затухает при увеличении времени ($\lambda_0(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$). Поэтому для упрощения модели положим $\lambda_0(t) \approx 0$. В результате, учитывая (16), (22), получаем

$$\vec{P}_\Phi = \vec{P}_\Phi e^{-i\omega t} = 4\pi R^2 b_3 \vec{e}_z = -\frac{4\pi R^2 e(v_1 c_1 + v_2 c_2)}{1 + c_{33}} E_0 e^{-i\omega t} \vec{e}_z.$$

Рассмотрим композит, состоящий из случайно размещенных в пространстве одинаковых наночастиц (фуллеренов), которые распределены с концентрацией v (число частиц в единице объема). Электрическая поляризация композита определяется соотношением $\vec{P} = v\vec{P}_\Phi$, а электрическая индукция – формулой $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}_0 + \vec{P}$, $\vec{E}_0 = E_0 \vec{e}_z$. В развернутом виде получим формулу

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}_0 = \epsilon_0 \left(1 - 4\pi R^2 \frac{ve(v_1 c_1 + v_2 c_2)}{\epsilon_0 (1 + c_{33})} \right) \vec{E}_0. \quad (23)$$

Теорема. *Относительная диэлектрическая проницаемость композита определяется формулой*

$$\epsilon_r = 1 - \frac{\tau}{h(\omega)} \sum_{l=1}^2 \frac{\omega_p^2 f_l}{\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l}, \quad (24)$$

где

$$h(\omega) = 1 + \sin(k_0 R) e^{ik_0 R} \sum_{l=1}^2 \frac{\omega \omega_0}{\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l}, \quad (25)$$

$$\omega_0 = \frac{2e^2 N}{3\pi c \epsilon_0 m_e R^2}, \quad \omega_p = \frac{e}{R} \sqrt{\frac{3N}{\pi \epsilon_0 m_e R}}, \quad f_l = \frac{N_l}{N},$$

$$f_1 = \frac{1}{3}, \quad f_2 = \frac{2}{3}, \quad \omega_0 = 6,62 \cdot 10^{15}, \quad \omega_p = 1,65 \cdot 10^{17},$$

$\tau = \frac{4\pi}{3} R^3 v$ – объемный коэффициент заполнения пространства сферическими частицами (суммарный объем частиц в единице объема пространства, $0 < \tau < 0,5$).

Доказательство. Преобразуем формулу (23), используя (21):

$$h(\omega) = 1 + c_{33} = 1 + \frac{4}{3} j_0 h_0^{(1)}(\xi_0) = 1 + \frac{4}{3} \alpha c_0 j_0(\epsilon_0) h_0^{(1)}(\xi_0) = 1 + i \frac{2c_0}{3\epsilon_0} R^2 k_0^3 j_0(\xi_0) h_0^{(1)}(\xi_0).$$

$$\text{Имеем } j_0(\xi_0) h_0^{(1)}(\xi_0) = -\frac{i}{k_0^2 R^2} \sin(k_0 R) e^{ik_0 R}.$$

Учитывая (16), получим

$$h(\omega) = 1 + \sin(k_0 R) e^{ik_0 R} \frac{\omega 2e^2 N}{3\pi c \epsilon_0 m_e R^2} \sum_{l=1}^2 \frac{N_l}{N(\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l)}.$$

Введем обозначения $\omega_0 = \frac{2e^2 N}{3\pi c \varepsilon_0 m_e R^2}$, $f_l = \frac{N_l}{N}$, получим искомую формулу (25). Далее преобразуем выражение из формулы (23):

$$A = 4\pi R^2 v \frac{e}{\varepsilon_0} \sum_{l=1}^2 v_l c_l = 4v \frac{e}{\varepsilon_0} \sum_{l=1}^2 N_l c_l = \frac{3eN\tau}{\pi \varepsilon_0 R^3} \sum_{l=1}^2 f_l c_l = \frac{3e^2 N \tau}{\pi \varepsilon_0 m_e R^3} \sum_{l=1}^2 \frac{1}{\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l}. \quad \text{Обозначим}$$

$$\omega_p^2 = \frac{3e^2 N}{\pi \varepsilon_0 m_e R^3}, \quad \text{тогда} \quad A = \tau \sum_{l=1}^2 \frac{\omega_p^2 f_l}{\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l}. \quad \text{Получена требуемая формула (24).}$$

Следствие. Для низких частот ($\omega < 10^{14}$) формула (25) принимает вид

$$h(\omega) = 1 + \beta \sum_{l=1}^2 \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\gamma_l},$$

где $\beta = \frac{R}{c} \omega_0 = 7,72 \cdot 10^{-3}$.

Для доказательства в соотношении (25) воспользуемся асимптотическими формулами:

$$\sin(k_0 R) \approx k_0 R = \omega \frac{R}{c}, \quad e^{ik_0 R} \approx 1, \quad \text{так как } k_0 R < 1,17 \cdot 10^{-4}.$$

Закключение. Разработана интегрально-дифференциальная аналитическая модель наноразмерной частицы (фуллерена). В результате дискретно-структурная частица, состоящая из 60 атомов углерода, которые образуют сферическую структуру, заменена на сплошную сферу, на которой с поверхностной плотностью распределены электрические диполи. При этом атомы углерода моделируются двумя типами диполей в соответствии с двумя уровнями электронов, расположенных на орбитах атомов. Колебания электрических моментов диполей при воздействии высокочастотного электромагнитного поля описаны двумя обыкновенными дифференциальными уравнениями второго порядка (осцилляторная модель). Для вычисления поверхностной плотности электрических моментов на поверхности сферы построена система интегральных уравнений, которая решена аналитически. Аналитическое решение дифференциальных и интегральных уравнений позволило вычислить электрический момент фуллерена при воздействии электромагнитного поля заданной частоты, что в свою очередь позволило определить эффективную диэлектрическую проницаемость композита из фуллеренов и представить в виде достаточно простой формулы.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственной программы научных исследований «Информатика и космос» задание 1.21 (№ 20140541), Республика Беларусь.

Acknowledgement

The author's research was supported by the State Program of Research "Informatics and cosmos" task 1.21 (no. 20140541), Republic of Belarus.

Список использованных источников

1. Виноградов, А. П. Электродинамика композитных материалов / А. П. Виноградов. – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 208 с.
2. Витязь, П. А. Основы нанотехнологий и наноматериалов / П. А. Витязь, Н. А. Свидунович. – Минск: Выш. шк., 2010. – 304 с.
3. Наноматериалы и нанотехнологии / В. М. Анищик [и др.]. – Минск: Изд. центр БГУ, 2008. – 373 с.
4. Федосюк, В. М. Наноструктурные пленки и нанопроволоки / В. М. Федосюк. – Минск: Изд. центр БГУ, 2006. – 311 с.
5. Borisenko, V. E. What is what in the nanoworld / V. E. Borisenko, S. Ossicini. – Wiley-VCH, Weinheim, 2004. – 335 p.
6. Зеленковский, В. М. Теоретическое исследование взаимодействия молекул водорода с фуллереном / В. М. Зеленковский, А. Г. Уляшин, А. Л. Пушкарчук // Низкоразмерные системы: физические основы получения, диагностики, функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем. – Минск: БГУ, 1999. – С. 48–51.

7. Шпилевский, М. Э. Фуллерены и фуллереноподобные структуры – основа перспективных материалов / М. Э. Шпилевский, Э. М. Шпилевский, В. Ф. Стельмах // Инженер.-физ. журн. – 2001. – Т. 74. № 6. – С. 106–112.
8. Ерофеенко, В. Т. Аналитическое моделирование в электродинамике / В. Т. Ерофеенко, И. С. Козловская. – Минск: БГУ, 2010. – 304 с.
9. Ерофеенко, В. Т. Модель вычисления эффективных параметров матричного композита из биизотропных частиц с учетом многократных переотражений электромагнитного поля / В. Т. Ерофеенко // Информатика. – 2015. – № 4. – С. 17–33.
10. Справочник по специальным функциям / под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. – М.: Наука, 1979. – 831 с.
11. Ерофеенко, В. Т. Теоремы сложения / В. Т. Ерофеенко. – Минск: Наука и техника, 1989. – 256 с.
12. Памятных, Е. А. Основы электродинамики материальных сред в переменных и неоднородных полях / Е. А. Памятных, Е. А. Туров. – М.: Наука, 2000. – 240 с.

References

1. Vinogradov A.P. *Electrodynamics of composite materials*. Moscow, Editorial URSS, 2001. 208 p. (In Russian).
2. Vityaz P.A., Svidunovich N.A. *Basis of nanotechnologies and nanomaterials*. Minsk, Visheishaya shkola Publ., 2010. 304 p. (In Russian).
3. Anishchik V.M., Borisenko V.E., Zhdanok S.A., Tolochko N.K., Fedosyuk V.M. *Nanomaterials and nanotechnologies*. Minsk, Publishing Center of the Belarusian State University, 2008. 373 p. (In Russian).
4. Fedosyuk V.M. *Nanostructural films and nanowires*. Minsk, Publishing Center of the Belarusian State University, 2006. 311 p. (In Russian).
5. Borisenko V.E., Ossicini S. What is what in the nanoworld. Weinheim, Wiley-VCH, 2004. 335 p. Doi:10.1002/9783527618606
6. Zelenkovskii V.M., Ulyashin A.G., Pushkarshuk A.L. Theoretical investigation of interaction of hydrogen molecule with fullerene. *Nizkorazmernye sistemy: fizicheskie osnovy polucheniya, diagnostiki, funktsionirovaniya i primeneniya nizkorazmernih elementov i sistem* [Low-dimensional systems: Physical basis of obtaining, diagnosis, functioning and application of low-dimensional elements and systems]. Minsk, Belarusian State University, 1999, pp. 48–51. (In Russian).
7. Shpilevsky M.E., Shpilevsky E.M., Stel'makh V.F. Fullerenes and fullerene-like structures: the basis for promising materials. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2001, vol. 74, no. 6, pp. 1499–1508.
8. Erofeenko V.T., Kozlovskaya I.S. *Analytical modeling in electrodynamics*. Minsk, Belarusian State University, 2010. 304 p. (In Russian).
9. Erofeenko V.T. Model for calculating effective parameters of matrix composites from bi-isotropic particles with regard to multiple reflections of electromagnetic field. *Informatika* [Informatics], 2015, no. 4, pp. 17–33. (In Russian).
10. Abramowitz M., Stegun I. (eds.). *Handbook of special functions*. Moscow, Nauka Publ., 1979. 831 p. (In Russian).
11. Erofeenko V.T. *Addition theorems*. Minsk, Nauka i tekhnika Publ., 1989. 256 p. (In Russian).
12. Pamyatnykh E.A., Turon E.A. *Basis of electrodynamics of material mediums in variable and inhomogeneous fields*. Moscow, Nauka Publ., 2000. 240 p. (In Russian).

Информация об авторе

Ерофеенко Виктор Тихонович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории математических методов защиты информации, Учреждение Белорусского государственного университета «НИИ прикладных проблем математики и информатики» (пр. Независимости, 4, 220030, Минск, Республика Беларусь). E-mail: bsu_erofeenko@tut.by

Information about the authors

Erofeenko Viktor Tikhonovich – Dr. Sc. (Physical and Mathematics), Professor, Chief Research Associate of the Research Laboratory of Mathematical Methods of Information Security, Research Institute for Applied Problems of Mathematics and Informatics, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: bsu_erofeenko@tut.by

Для цитирования

Ерофеенко, В. Т. Моделирование воздействия высокочастотной электромагнитной волны на фуллерен / В. Т. Ерофеенко // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2017. – № 1. – С. 103–114.

For citation

Erofeenko V.T. Simulation of the effect of high frequency electromagnetic wave on fullerene. *Vesti Natsyonal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-technichnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series], 2017, no. 1, pp. 103–114. (In Russian).